Энергия делокализации и кратность связи графита.

Безверхний Владимир Дмитриевич.

Украина, e-mail: bezvold@ukr.net

Учитывая кратность связи графита можно просто вычислить энергию делокализации графита.

Кратность связи графита составляет 1.54. Если быть точным, то 1.538. Это следует из длины связи C - C в пределах одного слоя – 1.42 Å, отсюда вычисляем кратность связи (1.538) по формуле [1].

$$c - \text{c bond multiplicity} = -0.06040343 - \frac{5.67787529}{L} + \frac{11.28562201}{L^2}$$

$$\text{E of c} - \text{c bonds} = -2221.34518418 + \frac{5065.62912191}{L} - \frac{1699.18638789}{L^2}$$

Кратность с–с графита (L = 1.42 Å) = 1.538 ≈ 1.54

Кратность с–с бензола (L = 1.397 Å) = 1.658

Ec–c графита (L = 1.42 Å) = 503.3161 кДж/моль

Ec–c бензола (L = 1.397 Å) = 534.0723 кДж/моль

Если учитывать, что энергия C - C связи с кратностью 1.5 составляет 493.3097 кДж/моль, а энергия C - C связи в графитовом слое составляет 503.3161 кДж/моль [1], то можно вычислить энергию делокализации графита в пересчете на 6 атомов углерода. Учитываем 6 связей в одном цикле, плюс еще 3 полные связи вне цикла, что очевидно исходя из формулы графита с трехэлектронной связью [1, p. 29].

ΔE = 503.3161 кДж/моль - 493.3097 кДж/моль = 10.0064 кДж/моль

10.0064 кДж/моль — это энергия, которая приходится на одну C - C связь. Значит, для 6 атомов углерода получим энергию делокализации равную 90.0576 кДж/моль.

ΔE = 9 * 10.0064 кДж/моль = 90.0576 кДж/моль (21.524 ккал/моль).

То есть, графит имеет энергию делокализации равную 21.524 ккал/моль.

Это небольшая энергия делокализации, но больше чем предполагалось. Сравните, бензол имеет энергию делокализации равную 58.416 ккал/моль. То есть, более чем в 2.7 раза больше. Учитывая малую кратность связи (1.54), энергия делокализации графита довольно высока. Но если вспомнить свойства графита, то все в порядке.

В конце добавлю, что между слоями графита действует очень слабое взаимодействие, так как расстояние между слоями составляет 3.35 Å. Поэтому классическими формулами изобразить данное взаимодействие невозможно. По своей сути это уже практически межмолекулярное взаимодействие, и именно по этой причине графитовый стержень пишет - слои легко отслаиваются.

1. Bezverkhniy V. D. Structure of the Benzene Molecule on the Basis of the Three-Electron Bond. SSRN Electronic Journal, Nov 2017. P. 10 - 11. https://dx.doi.org/10.2139/ssrn.3065241

